

E14-99-82

D.V.Sheptyakov, V.Yu.Pomjakushin, A.M.Balagurov,
A.A.Zakharov¹, C.Chailout-Bougerol², G.J.McIntyre³

STRUCTURE
OF NON-PHASE-SEPARATED $\text{La}_2\text{CuO}_{4.03}$ STUDIED
BY SINGLE-CRYSTAL NEUTRON DIFFRACTION

Submitted to «Physica C»

¹RSC «Kurchatov Institute», Kurchatov sq. 1, 123182, Moscow, Russia

²CNRS Laboratoire de Cristallographie, BP 166,
38042 Grenoble Cedex 9, France

³Institut Max von Laue — Paul Langevin, BP 156,
38042 Grenoble Cedex 9, France

Шептяков Д.В. и др.

E14-99-82

Нейтронно-дифракционное исследование структуры фазово-неразделенного монокристалла $\text{La}_2\text{CuO}_{4.03}$

Изучена структура монокристалла $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ с содержанием допирующего кислорода $y=0,03$ с помощью дифракции нейтронов при $T=13$ К. Несмотря на то, что содержание кислорода $y=0,03$ отвечает состоянию внутри «щели растворения» $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ ($0,01 < y < 0,06$), кристалл не разделяется на две фазы при низких температурах. Единственная фаза, образующая вещество, имеет симметрию $Cmca$. Показано, что дополнительный кислород (O4) находится вблизи позиции $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Структурные параметры всех атомов занимают промежуточные значения между величинами, ранее определенными для обедненной и обогащенной кислородом фазы, представляющими края «щели растворения», $y=0,01$ и $0,06$, соответственно. Результаты позволяют заключить, что фазово-разделяющиеся и неразделяющиеся соединения $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ структурно идентичны, и кристаллическая структура $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ монотонно изменяется при изменении содержания допирующего кислорода от 0 до 0,05.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка ОИЯИ и в Институте Лауэ–Ланжевена, Гренобль, Франция.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1999

Sheptyakov D.V. et al.

E14-99-82

Structure of Non-Phase-Separated $\text{La}_2\text{CuO}_{4.03}$ Studied by Single-Crystal Neutron Diffraction

The structure of a $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ single crystal with the excess oxygen content $y=0.03$ has been studied by means of neutron diffraction at $T=13$ K. Although the extra oxygen content of $y=0.03$ is inside the miscibility gap of $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ ($0.01 < y < 0.06$), the crystal is not phase-separated at low temperatures. The sole phase constituting the sample has $Cmca$ symmetry. It was confirmed that the extra oxygen, O4, is located close to the site $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. The structural parameters for all atoms lay between those previously determined for the oxygen-poor and oxygen-rich phases representing the edges of the miscibility gap, $y=0.01$ and 0.06 respectively. Our data allow us to conclude that, (1) The phase-separated and non-phase-separated $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ compounds are structurally identical, and (2) The crystal structure of $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ changes monotonically when the extra oxygen content changes from 0 to 0.05.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR and at the Institut Laue–Langevin, Grenoble, France.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1999